

# Нелинейное взаимодействие атомов с окружающей средой как одна из причин нарушения локального термодинамического равновесия в плазме газового разряда

И.В. Иванов, В.Н. Иванов\*

Омский государственный технический университет  
644050, г. Омск, пр. Мира, 11

Поступила в редакцию 15.10.2013 г.

Теоретически на примере водородоподобного атома исследуется одна из возможных причин нарушения локального термодинамического равновесия в плазме газового разряда. Используя нелинейное уравнение Шредингера, построенное для взаимодействующих с окружающей средой квантовых систем, численными методами промоделировано заселение атомных энергетических уровней. Предполагалось, что атомы испытывают перманентное стохастическое возмущение. Получено, что при высоких температурах распределение вероятности заселения практически совпадает с распределением Больцмана. Однако при относительно низких температурах наблюдается заметное отклонение заселенностей от этого распределения. Поэтому можно полагать, что именно нелинейное взаимодействие атомов с окружающей средой приводит к нарушению локального термодинамического равновесия.

*Ключевые слова:* стохастическое возмущение, нелинейное взаимодействие с окружающей средой; the stochastic perturbation, nonlinear interaction with the environment

Известно, что в низкотемпературной плазме газовых разрядов температура, которую определяют по заселенности верхних атомных энергетических уровней, заметно ниже электронной температуры, т.е. в такой плазме имеет место нарушение локального термодинамического равновесия (ЛТР) [1]. В настоящей статье рассмотрены возможные причины этого феномена.

Заселенность энергетических уровней атомов и молекул зависит от многих факторов. В случае термодинамического равновесия эта заселенность подчиняется каноническому распределению Гиббса:

$$P_n = A \exp\left(-\frac{E_n}{kT}\right), \quad (1)$$

где  $E_n$  – энергия уровня;  $k$  – постоянная Больцмана;  $T$  – температура;  $A$  – нормировочная константа.

Преобразования, приводящие к (1), строятся на априорном предположении, что вероятности попадания частицы в тот или иной элемент фазового пространства одинаковы, а энергия системы – величина постоянная. То обстоятельство, что температура газовых разрядов, определяемая с помощью (1), довольно часто отличается от температуры, определяемой другими методами, показывает, что при построении (1) учитываются не все факторы.

В работах [2–5] развивается иной подход к нахождению вероятности заселенности энергетических

уровней, позволяющий не накладывать на полную энергию системы априорных ограничений, которые осуществляют при выводе соотношения (1). Основными в этом методе являются допущения о перманентном возмущении квантовой подсистемы окружающей средой и ее самовоздействии через эту среду. В итоге с помощью метода интегралов по траекториям [6] для волновой функции подсистемы построено нелинейное уравнение Шредингера, которое учитывает как перманентное стохастическое возмущение квантовой подсистемы, так и ее взаимодействие с окружающей средой:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{1+i\alpha} (\hat{H} - U + \chi)\psi + U\psi + \frac{i\alpha}{1+\alpha^2} \langle \psi | (\hat{H} - U + \chi) | \psi \rangle \psi. \quad (2)$$

Здесь  $\hat{H}$  – гамильтониан изолированной подсистемы;  $U$  – оператор потенциальной энергии;  $\alpha > 0$  – параметр, значение которого зависит от плотности окружающей среды и который может адиабатически меняться;  $\chi = kT/2$ . Нелинейное слагаемое в (2) было получено в предположении, что, несмотря на стохастическое возмущение, квантовая подсистема не распадается.

Часть волновых функций, удовлетворяющих (2), можно найти, решив уравнение Шредингера:

$$i\hbar \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial t} = \frac{1}{1+i\alpha} (\hat{H} - U + \chi)\tilde{\psi} + U\tilde{\psi}, \quad (3)$$

\* Игорь Вячеславович Иванов (igor-v-ivanov@outlook.com); Вячеслав Николаевич Иванов (ivanovvn@mail.ru).

записанное в предположении, что стохастическое возмущение приводит к распаду подсистемы. Эти функции имеют вид

$$\psi = \frac{\tilde{\psi}}{\langle \tilde{\psi} | \tilde{\psi} \rangle^{1/2}}. \quad (4)$$

Однако уравнение (2) допускает существование и других решений. Если принять во внимание (4) (по сути (4) указывает, что для решений уравнения (2) справедлив принцип суперпозиции) и представить решение нелинейного уравнения Шредингера (2) как сумму:

$$\psi = \sum_n C_n(t) \psi_n(\mathbf{r}), \quad (5)$$

где  $\psi_n(\mathbf{r})$  – собственные функции стационарного уравнения Шредингера

$$\frac{1}{1+i\alpha}(\hat{H}-U)\psi_n + U\psi_n = \left(E_n - \frac{1}{1+i\alpha}\chi\right)\psi_n, \quad (6)$$

то коэффициенты  $C_n(t)$  – в общем случае как регулярные, так и нерегулярные функции времени. Эта нерегулярность указывает на возможность скачкообразных изменений квантовых состояний исследуемой подсистемы. Из-за этих квантовых скачков заселенность энергетических уровней является различной.

Из-за нелинейности исходного уравнения Шредингера, для того чтобы выяснить, как меняется заселенность того или иного энергетического уровня, необходимо одновременно отслеживать изменение всех квантовых состояний. Это можно сделать, воспользовавшись подходом, предложенным в [4, 5].

Поскольку для определения газовой температуры обычно используют излучение с высоковозбужденных уровней атомов и ионов, оптический электрон которых достаточно далек от ядра, в данном исследовании в качестве объекта выбраны водородоподобные атомы и ионы.

Особенностями решения уравнения (6) для водородоподобного атома являются неортогональность волновых функций, принадлежащих к разным энергетическим уровням, и комплексность константы разделения  $E_n$  [7].

Если перейти от коэффициентов  $C_n(t)$  к числам заполнения  $P_n = |C_n|^2$ , то, как показывает анализ [5, 8], водородоподобный атом находится, вероятнее всего, только на одном из подуровней возможных стационарных состояний. Причем это заполненное состояние – неустойчивое. Незаполненные состояния в достаточно плотной среде являются устойчивыми. Они теряют устойчивость, когда параметр  $\alpha$  оказывается меньше некоторого числа (это число для каждого уровня имеет свое значение):

$$\alpha \leq \alpha_n = \frac{\hbar\delta}{E_n^0 + \chi}, \quad (7)$$

где  $\delta$  – некоторое малое по величине положительное число;  $E_n^0$  – энергия  $n$ -го уровня изолированного водородоподобного атома.

Однако даже в случае выполнения условия (7) переходы между состояниями с различными значениями энергии возможны не всегда. Их вероятность зависит от двух параметров –  $\Delta$  и  $\sigma$  [9], которые для водородоподобного атома с точностью до малых более высокого порядка малости имеют вид

$$\Delta = \left(\frac{2\alpha}{\hbar}\right)^2 (|E_n^0| - |E_m^0|)(|E_n^0| + \chi); \quad (8)$$

$$\sigma = \left(\frac{2\alpha}{\hbar}\right) (2|E_n^0| - |E_m^0| + \chi). \quad (9)$$

При  $\Delta > 0$  (атом находится на более низком энергетическом уровне) и любом значении  $\sigma$  при выходе водородоподобного атома из положения равновесия он или вернется назад, или перескочит на более высокий энергетический уровень.

Если  $\Delta < 0$ , то при  $\sigma < 0$  атом, выйдя из положения равновесия, возвращается назад. При  $\sigma \geq 0$  атом, выйдя из положения равновесия, может как вернуться в исходное состояние, так и перейти в состояние с другой энергией.

Согласно (8) и (9) при температуре

$$T \geq \frac{2}{k} (|E_m^0| - 2|E_n^0|) \quad (10)$$

переходы возможны как на верхние, так и на нижние уровни. Однако вероятность этих переходов различна [отметим, что при  $\alpha \rightarrow 0$  переходы вверх и вниз не зависят от условия (10)].

Оценить вероятность заселения того или иного уровня можно методами численного моделирования.

Для вычисления вероятности заселения уровней мы использовали алгоритм, предложенный в [4]. Предполагалось, что справедливы эргодическая гипотеза и теорема Байеса [10]. Вероятность заселенности квантового уровня определялась как среднее по ансамблю атомов, в котором происходят квантовые скачки между уровнями. Вероятность возникновения предпосылок заселенности какого-либо подуровня квантового состояния с главным квантовым числом  $n$  пропорциональна величине

$$\tilde{P}_n = \frac{\hbar\delta}{9\chi} \frac{1}{g \left(1 + \frac{|E_n^0|}{\chi}\right)}, \quad (11)$$

где  $g = 2n^2$  – степень вырождения уровня с главным квантовым числом  $n$ . При выводе формулы (11) предполагалось, что при малых значениях параметра  $\alpha$  вероятность реализации его значения линейно зависит от величины этого числа:

$$P(\alpha) = 9\alpha. \quad (12)$$

Здесь 9 – константа.

Вероятность изменения квантового состояния с номером  $m$  при каждом скачке из состояния с номером  $n$  вычислялась по формуле

$$\Delta P_m = \begin{cases} \sqrt{P_n} Q_{nm} & (m \neq n), \\ \sqrt{P_n} (Q_{nn} - 1) & (m = n). \end{cases} \quad (13)$$

В (13) учтено, что при выходе из состояния  $n$  атом может вернуться в это же состояние, и введены следующие обозначения:  $v$  – равномерно распределенное на отрезке  $[0, 1]$  случайное число;  $P_n$  – вероятность заселения состояния с индексом  $n$ ; множитель

$$Q_{nm} = \frac{1}{Z_n} \eta(n, m) \tilde{P}_m. \quad (14)$$

Множитель  $\eta(n, m)$  учитывает дискриминацию возможных переходов:

$$\eta(n, m) = \begin{cases} 1 & \left( |E_m^0| \geq \left( 2|E_n^0| + \frac{kT}{2} \right) \right), \\ 0 & \left( |E_m^0| < \left( 2|E_n^0| + \frac{kT}{2} \right) \right), \end{cases} \quad (15)$$

величина  $Z_n$  – статистическая сумма:

$$Z_n = \sum_{m=1}^{\infty} \eta(m, n) \tilde{P}_m. \quad (16)$$

На рис. 1 представлены результаты численного эксперимента, полученные с помощью описанного

алгоритма [формулы (11)–(16)] при различных соотношениях между энергией нижнего уровня и температурой. Как видно из рис. 1,  $a$  и  $b$ , распределение вероятности заселенности квантовых уровней при температуре выше предела, определяемого формулой (10), практически совпадает с распределением Больцмана. Это, так же как и результаты по вероятности заселения уровней осцилляторов и ротаторов [3, 4], указывает на то, что используемый метод учета влияния окружения в значительной степени позволяет учитывать процессы, происходящие в газовой среде. То есть вероятности заселения энергетических уровней атомов и молекул определяются в первую очередь двумя факторами: перманентным стохастическим возмущением и нелинейным взаимодействием квантовых систем с окружением.

Рис. 1,  $в$  и  $г$  соответствуют температурам, при которых для нижних уровней водородоподобных атомов условие (10) не выполняется. Согласно полученным результатам в этом случае имеет место отклонение вероятности заселенности от распределения Больцмана. Причем вероятность заселенности верхних уровней может оказаться больше, чем вероятность заселения нижних. Другими словами, если «работают» только два отмеченных выше механизма, приводящие к разной заселенности уровней,

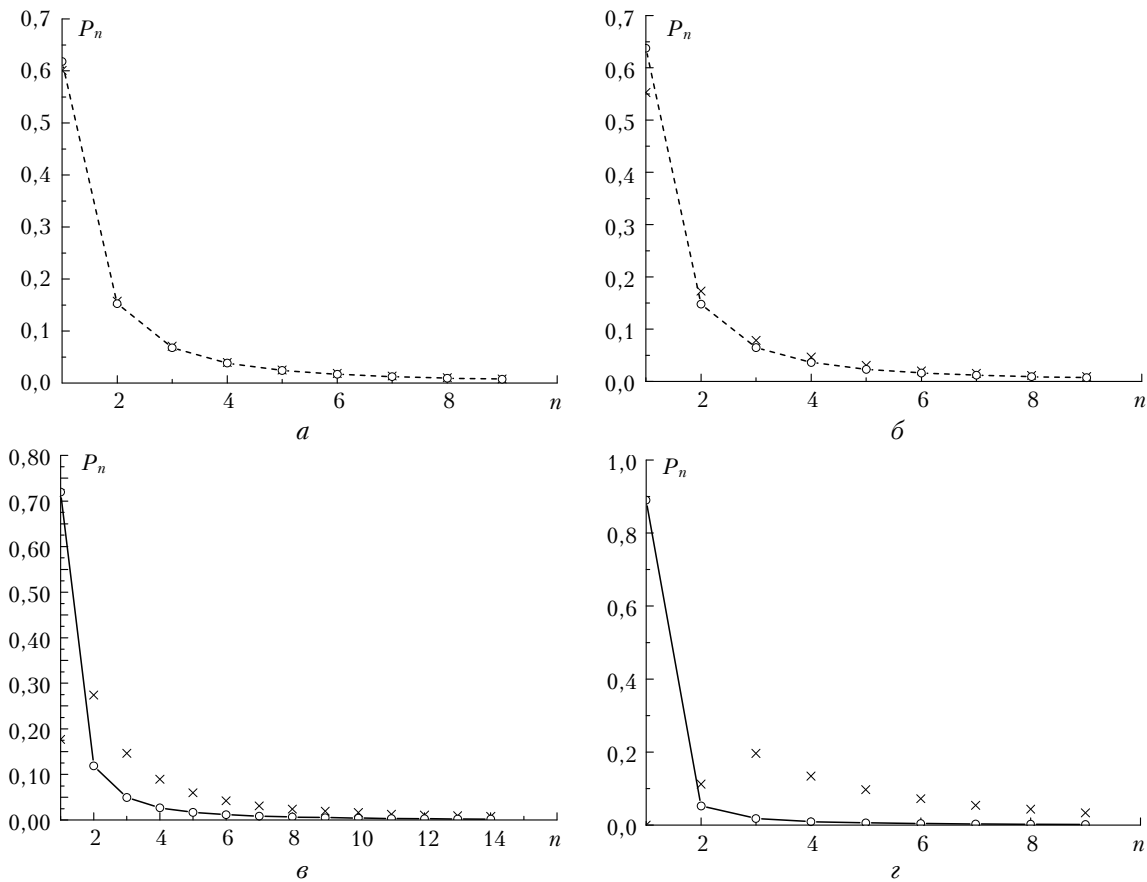


Рис. 1. Значения главного квантового числа  $n$  и вероятность возбуждения состояния  $P_n$  с энергией  $E_n$ . Кружками помечены вероятности, рассчитанные с помощью распределения Больцмана. Результаты численного моделирования, полученные для значения  $y = \frac{E_1}{kT} = 0,03$  ( $a$ );  $0,2$  ( $б$ );  $1,0$  ( $в$ );  $3,0$  ( $г$ ), указаны крестиками

то у ансамбля водородоподобных атомов может возникнуть спонтанная инверсия заселенности квантовых состояний. Следовательно, имеет место отклонение от термодинамического равновесия. При этом если определять температуру по спектрам излучения, то она, очевидно, окажется ниже, чем измеренная другими способами. Отметим, что наличие спонтанной инверсии заселенностей, испытывающих перманентное стохастическое возмущение водородоподобных атомов, можно проверить экспериментально. Если осветить ансамбль таких атомов  $\pi$ -импульсом излучения, резонансного квантовому переходу с какого-либо заполненного уровня на уровень с квантовым числом  $n = 1$ , то при наличии инверсии должно происходить увеличение энергии излучения.

Подводя итог, можно сделать вывод, что одной из причин нарушения локального термодинамического равновесия является нелинейное взаимодействие атомов с окружающей средой: самовоздействие атомов через окружающую среду.

1. *Методы* исследования плазмы / Под ред. В. Лохте-Хольтгревена. М.: Мир, 1971. 551 с.

2. *Иванов В.Н.* Кинетический способ описания релаксации квантовых систем // *Оптика атмосф.* 1991. Т. 4, № 1. С. 82–87.
3. *Иванов В.Н.* Эвристический способ описания релаксации квантовых систем // *Изв. вузов. Физ.* 1996. Т. 39, № 2. С. 7–13.
4. *Иванов В.Н., Иванов И.В.* Возможный эффект «исчезновения» излучения у ансамбля взаимодействующих молекул // *Оптика атмосф. и океана.* 2004. Т. 17, № 2–3. С. 201–205.
5. *Иванов В.Н., Иванов И.В.* Тепловое излучение системы слабосвязанных осцилляторов, испытывающих перманентное стохастическое возмущение // *Оптика атмосф. и океана.* 2007. Т. 20, № 11. С. 31–39.
6. *Фейнман Р., Хибс А.* Квантовая механика и интегралы по траекториям. М.: Мир, 1968. 382 с.
7. *Иванов В.Н.* Водородоподобный атом в марковском термостате // *Изв. вузов. Физ.* 1993. Т. 36, № 9. С. 8–11.
8. *Ivanov I.V., Ivanov V.N.* About possibility of spontaneous inversion of population hydrogen-like atom // *Conf. Abstracts AMPL-11.* Tomsk, 2011. P. 10.
9. *Андронов А.А., Леонтович Е.А., Гордон И.И., Майер А.Г.* Теория бифуркаций динамических систем на плоскости. М.: Наука, 1967. 487 с.
10. *Боровков А.А.* Теория вероятностей. М.: Наука, 1986. 431 с.

***I.V. Ivanov, V.N. Ivanov. Non-linear interaction of atoms with the environment as one of the causes of local thermodynamical equilibrium disturbance in gas-discharge plasma.***

Theoretically, by an example of a hydrogen-like atom one of the possible causes of the disturbance of local thermodynamic equilibrium is examined. Using the nonlinear Schrödinger equation, which is constructed for quantum systems interacting with the environment, population of atomic energy levels is numerically simulated. It was assumed that atoms have a permanent stochastic perturbation. It was found that at high temperatures the probability of population distribution is almost the same as the Boltzmann distribution. However, at relatively low temperatures, there is a noticeable deviation of populations from this distribution. This gives grounds to believe that the nonlinear interaction of atoms with the environment leads to disturbance of local thermodynamic equilibrium.